

KEMM08, Kemi: Teoretisk kemi, 15 högskolepoäng

Chemistry: Theoretical Chemistry, 15 credits

Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Naturvetenskapliga fakultetens utbildningsnämnd 2007-04-12 att gälla från och med 2007-07-01, höstterminen 2007.

Allmänna uppgifter

Kursen är en valbar kurs på avancerad nivå för en naturvetenskaplig masterexamen i kemi och en obligatorisk kurs för en naturvetenskaplig masterexamen i nanokemi.

Undervisningsspråk: Engelska och Svenska

Vid behov ges kursen i sin helhet på engelska.

Huvudområde

Kemi

Nanokemi

Fördjupning

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

Kursens mål

Kursen syftar till att ge god kännedom om de grundläggande teorierna kring kemisk bindning och intermolekylär växelverkan och hur dessa styr beteenden hos materien.

Kursens mål är att studenterna efter avslutat kurs skall ha förvärvat följande kunskaper och färdigheter:

- förstå och kunna applicera kvantmekaniska principer på molekylära system
- ha en djup förståelse av kemisk bindning
- använda kvantkemiska datorprogram för att beräkna egenskaper hos molekylära system, tolka resultat och bedöma felkällor
- förstå och kunna applicera statistisk mekaniska principer på ensembler av molekyler
- ha en djup förståelse av hur intermolekylär växelverkan påverkar materiens egenskaper
- använda statistisk mekaniska datorprogram för att beräkna egenskaper hos makroskopiska system, tolka resultat och bedöma felkällor

Kursens innehåll

Föreläsningar: Kursen täcker tre områden, kvantmekanik, kvantkemi och statistisk mekanik. Den kvantmekaniska delen tar upp de grundläggande ekvationer som styr mikroskopiska partiklars uppförande. Den kvantkemiska delen tar upp hur dessa grundläggande ekvationer styr atomers och molekylers beteenden. I den statistisk mekaniska delen används dessa resultat för att beskriva makroskopiska egenskaper.

Projekt: Två mindre projekt kommer att genomföras, ett kvantkemiskt och ett statistisk mekaniskt.

Kursens genomförande

Undervisningen består av föreläsningar och övningar där de teoretiska aspekterna behandlas. Under kursens gång genomförs två obligatoriska projekt som redovisas muntligt.

Kursens examination

Kursen examineras med en skriftlig eller muntlig tentamen. För studerande som ej godkänts vid ordinarie tentamen erbjuds ytterligare tentamenstillfällen i nära anslutning härtil.

Betyg

Betygsskalan omfattar betygsgraderna Underkänd, Godkänd, Väl godkänd. För godkänt betyg på hela kursen krävs godkänd tentamen och godkända projekt. Betyg på tentamen är Väl godkänd, Godkänd och Underkänd. Betyg på obligatoriska moment är Godkänd och Underkänd. Slutbetyget på kursen avgörs av tentamensresultatet.

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs grundläggande behörighet, Engelska B samt 90 högskolepoäng avklarade naturvetenskapliga kurser inklusive godkända kurser motsvarande:

- KEM101 Kemi, grundkurs 1 10 poäng och KEM102 Kemi, grundkurs 2 10 poäng, eller
 - KEM111 Kemi för miljövetare och biologer - grundkurs 1 10 p och KEM122 Kemi för miljövetare och biologer - grundkurs 2 10 p, eller
 - KEMA00 Allmän och analytisk kemi 7,5 högskolepoäng, KEMA01 Organisk kemi - grundkurs 7,5 hp, KEMA02 Oorganisk kemi - grundkurs 7,5 hp och KEMA03 Biokemi - grundkurs 7,5 hp
- samt

- KEM103 Kemi, grundkurs 3 10 poäng,
- KEM016 Fysikalisk kemi 10 p och
- MAT015 Matematik för naturvetare 1 10 p eller MAT131 Matematik 1 alfa 10 p

Tillträdeskraven är uppfyllda även för den som har grundläggande behörighet samt godkända kurser motsvarande:

- 90 högskolepoäng fysik inklusive FYS023 Fysik 3: Allmän kurs 20 poäng,
- 30 högskolepoäng matematik samt
- KEM016 Fysikalisk kemi 10 poäng

Motsvarande förkunskaper, som inhämtats på annat sätt, ger också tillträde till kursen.

Övrigt

Kursen kan inte tillgodoräknas i examen tillsammans med KEM063 Teoretisk kemi 10 poäng.